

CÔNG THỨC PHÂN TỬ HỢP CHẤT HỮU CƠ

- ☞ Biết công thức phân tử, công thức đơn giản nhất và phương pháp xác định các công thức này.
- ☞ Biết giải các bài tập lập công thức phân tử hợp chất hữu cơ.

I - CÔNG THỨC ĐƠN GIẢN NHẤT

1. Định nghĩa

Công thức đơn giản nhất là công thức biểu thị tỉ lệ tối giản về số nguyên tử của các nguyên tố trong phân tử.

2. Cách thiết lập công thức đơn giản nhất

Thiết lập công thức đơn giản nhất của hợp chất hữu cơ $C_xH_yO_z$ là tìm tỉ lệ :

$$x : y : z = n_C : n_H : n_O = \frac{m_C}{12,0} : \frac{m_H}{1,0} : \frac{m_O}{16,0}$$

dưới dạng tỉ lệ giữa các số nguyên tối giản.

Trong thực tế, kết quả phân tích định lượng các nguyên tố trong phân tử chất hữu cơ cho biết phần trăm khối lượng các nguyên tố nên ta thường xác định công thức đơn giản nhất dựa vào số liệu này. Đầu tiên lập tỉ lệ :

$$x : y : z = \frac{\%C}{12,0} : \frac{\%H}{1,0} : \frac{\%O}{16,0}$$

Sau đó biến đổi hệ thức trên về tỉ lệ giữa các số nguyên tối giản.

Thí dụ : Kết quả phân tích nguyên tố hợp chất X cho biết $\%C = 40,00\%$; $\%H = 6,67\%$, còn lại là oxi. Lập công thức đơn giản nhất của X.

Giải :

Gọi công thức phân tử của X là $C_xH_yO_z$ (với x, y, z nguyên dương).

- Từ kết quả phân tích định lượng, lập được hệ thức :

$$x : y : z = \frac{\%C}{12,0} : \frac{\%H}{1,0} : \frac{\%O}{16,0} = \frac{40,00}{12,0} : \frac{6,67}{1,0} : \frac{53,33}{16,0}$$

- Biến đổi hệ thức thành tỉ lệ giữa các số nguyên tối giản :

$$x : y : z = \frac{\%C}{12,0} : \frac{\%H}{1,0} : \frac{\%O}{16,0} = \frac{40,00}{12,0} : \frac{6,67}{1,0} : \frac{53,33}{16,0} = 3,33 : 6,67 : 3,33 = 1 : 2 : 1$$

Vậy công thức đơn giản nhất của X là CH_2O .

II - CÔNG THỨC PHÂN TỬ

1. Định nghĩa

Công thức phân tử là công thức biểu thị số lượng nguyên tử của mỗi nguyên tố trong phân tử.

2. Quan hệ giữa công thức phân tử và công thức đơn giản nhất

Thí dụ :

Hợp chất	Metan	Etilen	Ancol etylic	Axit axetic	Glucozơ
Công thức phân tử	CH ₄	C ₂ H ₄	C ₂ H ₆ O	C ₂ H ₄ O ₂	C ₆ H ₁₂ O ₆
Công thức đơn giản nhất	CH ₄	CH ₂	C ₂ H ₆ O	CH ₂ O	CH ₂ O

Nhận xét :

- Số nguyên tử của mỗi nguyên tố trong công thức phân tử là số nguyên lần số nguyên tử của nó trong công thức đơn giản nhất.
- Trong nhiều trường hợp, công thức phân tử cũng chính là công thức đơn giản nhất.

Thí dụ : Ancol etylic C₂H₆O, metan CH₄,...

- Một số chất có công thức phân tử khác nhau nhưng có cùng một công thức đơn giản nhất.

Thí dụ : Axetilen C₂H₂ và benzen C₆H₆ ; axit axetic C₂H₄O₂ và glucozơ C₆H₁₂O₆,...

3. Cách thiết lập công thức phân tử hợp chất hữu cơ

a) Dựa vào thành phần phần trăm khối lượng các nguyên tố

Xét sơ đồ : $C_xH_yO_z \rightarrow xC + yH + zO$

Khối lượng : $M \text{ (g)} \quad 12,0.x \text{ (g)} \quad 1,0.y \text{ (g)} \quad 16,0.z \text{ (g)}$

Thành phần phần trăm khối lượng : 100% % C % H % O

Từ tỉ lệ $\frac{M}{100\%} = \frac{12,0.x}{\%C} = \frac{1,0.y}{\%H} = \frac{16,0.z}{\%O}$

ta có : $x = \frac{M.\%C}{12,0.100\%}$; $y = \frac{M.\%H}{1,0.100\%}$; $z = \frac{M.\%O}{16,0.100\%}$

Thí dụ : Phenolphtalein – chất chỉ thị màu dùng nhận biết dung dịch bazơ – có phần trăm khối lượng C, H và O lần lượt bằng 75,47%, 4,35% và 20,18%. Khối lượng mol phân tử của phenolphtalein bằng 318,0 g/mol. Hãy lập công thức phân tử của phenolphtalein.

Giải :

Ta thấy $\%C + \%H + \%O = 100\%$, vậy thành phần phân tử phenolphtalein gồm ba nguyên tố C, H, O nên có thể đặt công thức phân tử là $C_xH_yO_z$ (với x, y, z nguyên dương). Ta có :

$$x = \frac{318.75,47\%}{12,0.100\%} = 20 ; y = \frac{318.4,35\%}{1,0.100\%} = 14 ; z = \frac{318.20,18\%}{16,0.100\%} = 4$$

Công thức phân tử của phenolphtalein là $C_{20}H_{14}O_4$.

b) Thông qua công thức đơn giản nhất

Thí dụ : Chất hữu cơ X có công thức đơn giản nhất CH_2O và có khối lượng mol phân tử bằng 60,0 g/mol. Xác định công thức phân tử của X.

Giải :

Công thức phân tử của X là $(CH_2O)_n$ hay $C_nH_{2n}O_n$.

Từ $M_X = (12,0 + 2.1,0 + 16,0).n = 60,0$ ta được $n = 2$.

Vậy X có công thức phân tử $C_2H_4O_2$.

c) Tính trực tiếp theo khối lượng sản phẩm đốt cháy

Thí dụ : Hợp chất Y chứa các nguyên tố C, H, O. Đốt cháy hoàn toàn 0,88 gam Y thu được 1,76 gam CO_2 và 0,72 gam H_2O . Tỉ khối hơi của Y so với không khí xấp xỉ 3,04. Xác định công thức phân tử của Y.

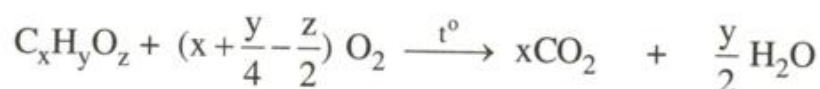
Giải :

$$M_Y = 29,0 \cdot 3,04 \approx 88,0 \text{ (g/mol)} ; \quad n_Y = \frac{0,88}{88,0} = 0,010 \text{ (mol)} ;$$

$$n_{CO_2} = \frac{1,76}{44,0} = 0,040 \text{ (mol)} ; \quad n_{H_2O} = \frac{0,72}{18,0} = 0,040 \text{ (mol)}.$$

Đặt công thức phân tử của Y là $C_xH_yO_z$ (với x, y, z nguyên dương).

Phương trình hoá học của phản ứng cháy :



1 mol	x mol	$\frac{y}{2}$ mol
0,010 mol	0,040 mol	0,040 mol

Từ tỉ lệ : $\frac{1}{0,010} = \frac{x}{0,040} = \frac{y}{2,0,040}$ ta được $x = 4 ; y = 8$.

Từ $M_X = 12,0.4 + 1,0.8 + 16,0z = 88,0$ ta có $z = 2$.

Vậy, công thức phân tử của Y là $C_4H_8O_2$.

BÀI TẬP

- Tính khối lượng mol phân tử của các chất sau :
 - Chất A có tỉ khối hơi so với không khí bằng 2,07.
 - Thể tích hơi của 3,30 gam chất X bằng thể tích của 1,76 gam khí oxi (đo ở cùng điều kiện về nhiệt độ, áp suất).
- Limonen* là một chất có mùi thơm dịu được tách từ tinh dầu chanh. Kết quả phân tích nguyên tố cho thấy limonen được cấu tạo từ hai nguyên tố C và H, trong đó C chiếm 88,235% về khối lượng. Tỉ khối hơi của limonen so với không khí gần bằng 4,690. Lập công thức phân tử của limonen.
- Đốt cháy hoàn toàn 0,30 gam chất A (phân tử chỉ chứa C, H, O) thu được 0,44 gam khí cacbonic và 0,18 gam nước. Thể tích hơi của 0,30 gam chất A bằng thể tích của 0,16 gam khí oxi (ở cùng điều kiện về nhiệt độ, áp suất).

Xác định công thức phân tử của chất A.
- Từ tinh dầu hồi, người ta tách được *anetol* – một chất thơm được dùng sản xuất kẹo cao su. Anetol có khối lượng mol phân tử bằng 148,0 g/mol. Phân tích nguyên tố cho thấy, anetol có %C = 81,08% ; %H = 8,10%, còn lại là oxi. Lập công thức đơn giản nhất và công thức phân tử của anetol.
- Hợp chất X có phần trăm khối lượng cacbon, hiđro và oxi lần lượt bằng 54,54%, 9,10% và 36,36%. Khối lượng mol phân tử của X bằng 88,0 g/mol. Công thức phân tử nào sau đây ứng với hợp chất X ?

A. $C_4H_{10}O$ B. $C_4H_8O_2$ C. $C_5H_{12}O$ D. $C_4H_{10}O_2$
- Hợp chất Z có công thức đơn giản nhất là CH_3O và có tỉ khối hơi so với hiđro bằng 31,0. Công thức phân tử nào sau đây ứng với hợp chất Z ?

A. CH_3O B. $C_2H_6O_2$ C. C_2H_6O D. $C_3H_9O_3$